

Large Eddy Simulations of turbulent premixed flames

Doctoral Thesis**Author(s):**

Farrace, Daniele

Publication date:

2017

Permanent link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-010890926>

Rights / license:

In Copyright - Non-Commercial Use Permitted

Diss. ETH No. 24153

Large Eddy Simulations of turbulent premixed flames

A thesis submitted to attain the degree of
DOCTOR OF SCIENCES of ETH ZURICH
(Dr. sc. ETH Zurich)

presented by

Daniele Farrace

Master of Science in Mechanical Engineering
ETH Zurich

born July 8, 1987
citizen of Switzerland and Italy

accepted on the recommendation of

Prof. Dr. K. Boulouchos, ETH Zurich, examiner
Prof. Dr. E. Mastorakos, University of Cambridge, co-examiner
Dr. Y. M. Wright, ETH Zurich, co-examiner

2017

Abstract

A finite volume Large Eddy Simulation-Conditional Moment Closure (LES-CMC) combustion model for predictions of turbulent premixed flames is developed and validated against experiments and direct numerical simulations (DNS). As spatial fluctuations of conditional quantities are much weaker than their corresponding unconditional values, a relative coarse spatial resolution can be employed for the CMC grid. Its unstructured topology allows refinement in regions where turbulence inhomogeneity is expected, providing an improved description of the turbulence-chemistry interaction phenomenon, while maintaining affordable computational costs. Subgrid scale progress variable variance and scalar dissipation rate are closed with models associated with the subgrid scale combustion, turbulence and molecular diffusion processes of premixed flames using detailed kinetics.

In a first validation study, the LES-CMC numerical framework is applied to turbulent premixed bluff body methane-air flames at conditions far from and close to global blow-off. The simulations are observed to effectively reproduce the general trends, especially considering the challenging conditions at very lean mixtures (down to $\phi=0.64$): the characteristic ‘M-shaped’ morphology of the flame close to blow-off and the significant increase in the flame brush thickness compared to the flame far from blow-off is accurately replicated. Formaldehyde and OH distributions are compared with PLIF measurements and good agreement is reported supporting previous experimental observations. Quantitative comparisons of flame surface density and local flame curvature statistics are also calculated which agree well with experimental data, suggesting a comprehensive description of the physico-chemical processes of the proposed modelling strategy.

In order to investigate differential diffusion effects, the unity Lewis number assumption is relaxed. Planar laminar simulations performed with the spatially-homogeneous non-unity Lewis number CMC are successfully validated against physical-space fully-resolved reference solutions. Curvature effects are further evaluated for laminar flames having different effective Lewis numbers. The effect of turbulence on the flame structure is qualitatively analysed for the flame close to global blow-off, where simulations including and neglecting differential diffusion are compared. Overall, both the unity and the non-unity computations predict the characteristic ‘M-shaped’ flame observed experimentally, although some differences are identified.

In a second validation study, simulations of unsteady syngas-air flames propagating in a confined geometry are performed and compared to their respective DNS computations. The pressure time evolutions computed by LES-CMC are in very good agreement with DNS results for three prescribed initial turbulent fields with approximative u'/s_L ratios of 2, 6 and 12, respectively. Differential diffusion effects are found to be non-negligible, irrespective of the turbulence intensity. The LES-CMC framework is able to accurately reproduce the characteristic features of the flame morphology seen in the DNS, i.e. a contiguous flame front for the lowest u'/s_L ratio and occasional detached islands of burned gases for the intermediate case. For the case with the highest turbulence intensity, the flame appears disrupted due to small eddies penetrating the flame front and affecting its structure. Conditional filtered averages of temperature and selected major and minor species are in very good agreement with DNS data, indicating the suitability of LES-CMC for finite-rate chemistry problems, such as pollutant formations (CO and NO_x in particular).

Overall, the developed numerical framework shows considerable promise for predicting turbulent premixed combustion for a variety of conditions without the need of tuning case-specific model constants. The highly predictive capabilities as well as the contained computational costs make this model a suitable candidate for ‘real-life’ combustion simulations for product development.

Kurzfassung

In dieser Dissertation wurde ein finite Volumen Large Eddy Simulation-Conditional Moment Closure (LES-CMC) Verbrennungsmodell für die Vorhersagen von turbulenten Vormischflammen entwickelt und validiert mittels experimenteller Messungen und direkter numerischer Simulation (DNS). Die Verfeinerung des unstrukturierten CMC-Gitters in Bereichen mit hoher turbulenter Inhomogenität erlaubt eine verbesserte Beschreibung der Interaktion zwischen Turbulenz und Chemie und gleichzeitig die Aufrechterhaltung eines akzeptablen Rechnungsaufwandes. Die Modellierung von Subgrid-Skala (SGS) Fortschrittsvariable-Varianz und Skaldardissipationsrate wurden berücksichtigt anhand von SGS Modelle von Verbrennung, Turbulenz und molekulare Diffusion von Vormischflammen unter Verwendung von detaillierter Chemie.

In einer ersten Validierungsstudie wurde das LES-CMC Modell an turbulenten vorgemischten ‘bluff-body’ Methan-Luft Flammen weit und nahe der globalen Löschung angewandt. Die Simulationen konnten die allgemeinen Tendenzen reproduzieren, unter Betracht der anspruchsvollen Bedingungen bei sehr mageren Mischungen (bis zu $\phi=0.64$): die Charakteristische ‘M-förmige’ Morphologie der Flamme nahe der globalen Löschung und die beträchtliche Zunahme der turbulente Flammstärke im Vergleich zu Bedingungen weit der globalen Löschung zeigten eine gute Übereinstimmung. Die simulierte Formaldehyd und OH-Verteilungen wurden mit PLIF Messungen verglichen und sind in guter Übereinstimmung. Quantitative Statistiken, Vergleiche von Flammenoberflächendichte und lokale Krümmung sind ebenfalls mit den experimentellen Daten in guter Übereinstimmung, was eine umfassende Beschreibung der physikalisch-chemischen Prozesse der vorgeschlagenen Modellierungsstrategie zeigt.

Zur Erforschung des Effekts der differentiellen Diffusion wurde die Annahme der Einheits-Lewis-Zahl entspannt. Planare laminare Simulationen mit dem räumlich-homogenen CMC Model mit nicht-einheitlicher Lewis Zahl wurden erfolgreich anhand von aufgelösten Referenzlösungen im physikalischen Raum validiert. Die Wirkung der Flammenkrümmung ist untersucht für unterschiedliche effektive Lewis Zahlen. Die Turbulenzwirkung auf die Flammstruktur wurde qualitativ analysiert für die Flamme nahe an der globalen Löschung mit und ohne Einbeziehung von differentieller Diffusion. Insgesamt wurde die ‘M-förmige’ Form der Flamme für beide nicht- und Einheit Lewis-Zahl Modellen vorhergesagt, obwohl gewisse Unterschiede beobachtet wurden.

In einer zweiten Validierungsstudie wurden Simulationen der Flammenausbreitung einer Syngas-Luft Mischung in einer geschlossenen Geometrie durchgeführt. Die Simulationsergebnisse wurden mit verfügbaren DNS Resultaten verglichen. Die von LES-CMC berechneten zeitlichen Druckverläufe sind in sehr guter Übereinstimmung mit den DNS-Ergebnissen für alle drei vorgeschriebenen initialen Turbulenzfelder. Differentielle Diffusionseffekte erweisen sich als nicht vernachlässigbar, unabhängig von der Turbulenzintensität. Das LES-CMC-Framework war in der Lage die charakteristischen Merkmale der Flammmorphologie für alle untersuchten Turbulenzbedingungen wiederzugeben, d.h. eine zusammenhängende Flammenfront mit einigen freistehenden Inseln von verbrannten Gasen. Für den meist turbulenten Fall erschien die Flamme als gestört, bedingt durch kleine Wirbelstrukturen, welche in die Flammenfront eindringen. Gefilterte Mittelwerte von Temperatur und Spezies Konzentrationen wiedergeben die DNS Validierungsdaten mit guter Genauigkeit was auf die Eignung des LES-CMC Modells für Probleme mit finiter-rate Chemie wie z.B. Schadstoffbildung (insbesondere CO und NO_x) hindeutet.

Insgesamt zeigt das entwickelte numerische Framework ein beträchtliches Potential für die Vorhersage von turbulenten Vormischflammen für eine Vielzahl von Bedingungen ohne die Notwendigkeit, konfiguration-spezifische Modellkonstanten anzupassen. Die prediktiven Fähigkeiten sowie die niedrigen Rechenkosten machen dieses Modell zu einem geeigneten Kandidaten für applikationsrelevante Verbrennungssimulationen für die Produktentwicklung.